```
data_lach17

_publ_section_comment
;
The solvent molecules were located in the structure, however some
disorder was observed between an acetonitrile
molecule and a diether ether molecule, this caused some of the atoms
within these molecules to have large errors.
A H+ ion must be present in the structure to balance the charge, this
is most likely coordinating between the P=O
groups at the top of the anion, however it can not be seen due to the
quality of the data.
;
_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             ?
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C48 H91 N5 O41 P2 Si W10'
_chemical_formula_weight          3322.79

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0033   0.0016
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0061   0.0033
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0106   0.0060
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.0817   0.0704
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.1023   0.0942
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -0.8490   6.8722
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Triclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'P-1'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, -y, -z'

_cell_length_a                    13.9167(11)
_cell_length_b                    15.4099(12)
_cell_length_c                    19.5468(15)
_cell_angle_alpha                 98.5480(10)
_cell_angle_beta                  110.2710(10)
_cell_angle_gamma                 91.8990(10)
_cell_volume                      3872.4(5)
_cell_formula_units_Z             2
_cell_measurement_temperature     293(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       1.9
```

```
_cell_measurement_theta_max       30.9

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.1
_exptl_crystal_size_mid           0.1
_exptl_crystal_size_min           0.1
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.850
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              3052
_exptl_absorpt_coefficient_mu     14.935
_exptl_absorpt_correction_type    empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min   ?
_exptl_absorpt_correction_T_max   ?
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_radiation_wavelength      0.67030
_diffrn_radiation_type            'Synchrotron'
_diffrn_radiation_source          'Daresbury SRS'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Station 9.8'
_diffrn_measurement_method        'CCD slices'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             34889
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0343
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0692
_diffrn_reflns_limit_h_min        -20
_diffrn_reflns_limit_h_max        20
_diffrn_reflns_limit_k_min        -23
_diffrn_reflns_limit_k_max        14
_diffrn_reflns_limit_l_min        -26
_diffrn_reflns_limit_l_max        29
_diffrn_reflns_theta_min          1.92
_diffrn_reflns_theta_max          30.89
_reflns_number_total              25461
_reflns_number_gt                 19916
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        ?
_computing_cell_refinement        ?
_computing_data_reduction         ?
_computing_structure_solution     'SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics     'Ortep-3 for Windows (Farrugia,
1997)'
_computing_publication_material   'WinGX (Farrugia, 1999)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
```

```
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0500P)^2^+41.7568P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          25461
_refine_ls_number_parameters      941
_refine_ls_number_restraints      391
_refine_ls_R_factor_all           0.0659
_refine_ls_R_factor_gt            0.0493
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1317
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1216
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.025
_refine_ls_restrained_S_all       1.030
_refine_ls_shift/su_max           3.310
_refine_ls_shift/su_mean          0.005

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.1811(8) 0.2482(7) 0.9918(6) 0.0294(17) Uani 1 1 d U . .
C2 C 0.2427(9) 0.1926(7) 0.9665(7) 0.039(2) Uani 1 1 d U . .
H2 H 0.2186 0.1638 0.9176 0.047 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.2141(8) 0.2909(8) 1.0648(6) 0.035(2) Uani 1 1 d U . .
H3 H 0.1723 0.3276 1.0817 0.042 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.3402(9) 0.1798(9) 1.0138(9) 0.051(3) Uani 1 1 d U . .
H4 H 0.3821 0.1435 0.9968 0.061 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.3127(9) 0.2772(10) 1.1125(7) 0.050(3) Uani 1 1 d U . .
H5 H 0.3362 0.3057 1.1615 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.3745(9) 0.2231(10) 1.0885(9) 0.057(3) Uani 1 1 d U . .
C7 C 0.4815(11) 0.2072(14) 1.1381(13) 0.098(5) Uani 1 1 d U . .
C8 C 0.5265(14) 0.2631(17) 1.2146(14) 0.140(8) Uani 1 1 d U . .
H8A H 0.5974 0.2529 1.2371 0.210 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.4890 0.2475 1.2447 0.210 Uiso 1 1 calc R . .
H8C H 0.5216 0.3243 1.2106 0.210 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C -0.3229(7) 0.4773(6) 0.9260(5) 0.0245(16) Uani 1 1 d U . .
C10 C -0.4208(7) 0.4983(6) 0.8825(5) 0.0288(19) Uani 1 1 d U . .
H10 H -0.4500 0.4737 0.8326 0.035 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C -0.2812(7) 0.5165(7) 0.9991(5) 0.032(2) Uani 1 1 d U . .
H11 H -0.2163 0.5038 1.0280 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
```

C12 C -0.4729(8) 0.5563(7) 0.9154(5) 0.0307(19) Uani 1 1 d U . .
H12 H -0.5385 0.5682 0.8870 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C -0.3347(7) 0.5752(6) 1.0306(5) 0.0263(17) Uani 1 1 d U . .
H13 H -0.3058 0.6002 1.0804 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C -0.4316(7) 0.5966(6) 0.9878(5) 0.0247(16) Uani 1 1 d U . .
C15 C -0.4908(7) 0.6600(7) 1.0190(6) 0.0290(19) Uani 1 1 d U . .
C16 C -0.4495(8) 0.6969(7) 1.0994(6) 0.033(2) Uani 1 1 d U . .
H16A H -0.4951 0.7373 1.1108 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H -0.3828 0.7274 1.1120 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
H16C H -0.4440 0.6499 1.1274 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.3667(8) 0.0064(7) 0.6505(6) 0.033(2) Uani 1 1 d U . .
H17A H 0.3535 0.0254 0.6032 0.039 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.4255 0.0435 0.6865 0.039 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.3946(9) -0.0878(8) 0.6439(7) 0.041(3) Uani 1 1 d U . .
H18A H 0.4025 -0.1091 0.6891 0.062 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.4581 -0.0901 0.6348 0.062 Uiso 1 1 calc R . .
H18C H 0.3411 -0.1240 0.6037 0.062 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.2633(8) 0.1196(6) 0.6878(6) 0.0292(18) Uani 1 1 d U . .
H19A H 0.2060 0.1280 0.7048 0.035 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.3250 0.1472 0.7278 0.035 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.2472(9) 0.1671(7) 0.6243(6) 0.036(2) Uani 1 1 d U . .
H20A H 0.3010 0.1568 0.6048 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.2481 0.2291 0.6408 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H20C H 0.1819 0.1459 0.5865 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.2830(10) -0.0158(8) 0.7431(6) 0.040(2) Uani 1 1 d U . .
H21A H 0.2238 -0.0021 0.7567 0.048 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.2815 -0.0794 0.7323 0.048 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.3786(13) 0.0188(10) 0.8077(7) 0.060(4) Uani 1 1 d U . .
H22A H 0.4335 -0.0165 0.8059 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.3665 0.0164 0.8529 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H22C H 0.3972 0.0788 0.8059 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.1809(7) -0.0264(7) 0.6106(6) 0.031(2) Uani 1 1 d U . .
H23A H 0.1897 -0.0889 0.6046 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.1780 -0.0065 0.5652 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.0776(9) -0.0131(8) 0.6217(8) 0.049(3) Uani 1 1 d U . .
H24A H 0.0797 -0.0321 0.6668 0.074 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.0228 -0.0470 0.5807 0.074 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 0.0659 0.0482 0.6246 0.074 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.3180(11) 0.2323(8) 0.4195(9) 0.054(3) Uani 1 1 d DU . .
H25A H 0.2758 0.1772 0.4092 0.065 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.3712 0.2359 0.4678 0.065 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.3694(14) 0.2311(10) 0.3610(10) 0.074(5) Uani 1 1 d DU . .
H26A H 0.3173 0.2270 0.3128 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.4091 0.1813 0.3618 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
H26C H 0.4137 0.2844 0.3719 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.2081(9) 0.2961(8) 0.4807(7) 0.041(2) Uani 1 1 d U . .
H27A H 0.1676 0.2395 0.4665 0.049 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.2644 0.2946 0.5266 0.049 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.1418(12) 0.3661(9) 0.4948(10) 0.059(4) Uani 1 1 d U . .
H28A H 0.1763 0.4231 0.5002 0.088 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.1291 0.3609 0.5393 0.088 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 0.0776 0.3592 0.4539 0.088 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.1696(11) 0.3087(10) 0.3508(9) 0.064(4) Uani 1 1 d DU . .
H29A H 0.2001 0.3192 0.3147 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.1290 0.3573 0.3567 0.076 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.0978(15) 0.2226(13) 0.3208(10) 0.088(6) Uani 1 1 d DU . .
H30A H 0.1375 0.1739 0.3159 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.0477 0.2264 0.2733 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
H30C H 0.0633 0.2139 0.3544 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.3203(9) 0.3951(7) 0.4449(8) 0.045(3) Uani 1 1 d U . .
H31A H 0.3465 0.4014 0.4057 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.2765 0.4424 0.4471 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.4102(13) 0.4091(13) 0.5168(11) 0.084(6) Uani 1 1 d U . .
H32A H 0.3867 0.4002 0.5562 0.126 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.4419 0.4681 0.5265 0.126 Uiso 1 1 calc R . .
H32C H 0.4593 0.3679 0.5135 0.126 Uiso 1 1 calc R . .

C33 C 0.7875(13) 0.1464(11) 0.1000(8) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
H33A H 0.8448 0.1230 0.1346 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.7246 0.1166 0.0993 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.7894(13) 0.2447(11) 0.1278(9) 0.069(5) Uani 1 1 d U . .
H34A H 0.8589 0.2683 0.1565 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.7479 0.2530 0.1582 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
H34C H 0.7627 0.2747 0.0864 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.7030(12) 0.1526(11) -0.0327(9) 0.074(4) Uani 1 1 d DU . .
H35A H 0.7154 0.1456 -0.0791 0.088 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.6980 0.2148 -0.0184 0.088 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C 0.5980(12) 0.1023(13) -0.0471(16) 0.144(12) Uani 1 1 d DU . .
H36A H 0.5899 0.0483 -0.0809 0.216 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.5438 0.1381 -0.0680 0.216 Uiso 1 1 calc R . .
H36C H 0.5952 0.0894 -0.0012 0.216 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.7977(9) 0.0260(8) 0.0097(7) 0.041(2) Uani 1 1 d U . .
H37A H 0.8567 0.0104 0.0484 0.049 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.7365 -0.0022 0.0131 0.049 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.8048(13) -0.0109(8) -0.0652(8) 0.057(4) Uani 1 1 d U . .
H38A H 0.7466 0.0038 -0.1041 0.086 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.8053 -0.0738 -0.0703 0.086 Uiso 1 1 calc R . .
H38C H 0.8670 0.0141 -0.0683 0.086 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.8867(11) 0.1744(9) 0.0218(8) 0.051(3) Uani 1 1 d U . .
H39A H 0.8829 0.2371 0.0349 0.061 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.8859 0.1634 -0.0286 0.061 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.9874(11) 0.1498(9) 0.0723(11) 0.066(4) Uani 1 1 d U . .
H40A H 0.9865 0.1546 0.1216 0.099 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 1.0427 0.1888 0.0725 0.099 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.9972 0.0903 0.0551 0.099 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.2738(6) 0.0216(5) 0.6733(4) 0.0238(14) Uani 1 1 d U . .
N2 N 0.2523(8) 0.3073(6) 0.4220(6) 0.042(2) Uani 1 1 d U . .
N3 N 0.7937(7) 0.1261(6) 0.0241(5) 0.0362(18) Uani 1 1 d U . .
O1 O -0.0090(5) 0.1976(4) 0.5057(3) 0.0238(12) Uani 1 1 d U . .
O2 O -0.1965(5) 0.2645(4) 0.4995(3) 0.0238(12) Uani 1 1 d U . .
O3 O -0.3663(6) 0.3631(5) 0.4589(4) 0.0319(14) Uani 1 1 d U . .
O4 O -0.3631(5) 0.2277(4) 0.5375(3) 0.0244(12) Uani 1 1 d U . .
O5 O -0.5334(5) 0.1057(5) 0.4983(4) 0.0279(13) Uani 1 1 d U . .
O6 O -0.3337(5) 0.0530(4) 0.5333(3) 0.0211(11) Uani 1 1 d U . .
O7 O -0.1766(5) -0.0597(4) 0.5494(4) 0.0253(13) Uani 1 1 d U . .
O8 O -0.1354(5) 0.1218(4) 0.5694(3) 0.0220(11) Uani 1 1 d U . .
O9 O -0.0189(5) 0.3515(4) 0.5954(3) 0.0230(11) Uani 1 1 d U . .
O10 O -0.1828(5) 0.4287(4) 0.5730(4) 0.0251(12) Uani 1 1 d U . .
O11 O -0.3354(5) 0.3941(4) 0.6122(4) 0.0249(12) Uani 1 1 d U . .
O12 O -0.4510(5) 0.2192(4) 0.6373(3) 0.0232(11) Uani 1 1 d U . .
O13 O -0.4284(5) 0.0551(4) 0.6330(3) 0.0250(12) Uani 1 1 d U . .
O14 O -0.2636(5) -0.0209(4) 0.6571(3) 0.0216(11) Uani 1 1 d U . .
O15 O -0.0817(5) 0.0483(4) 0.6909(3) 0.0211(11) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.0329(5) 0.2206(4) 0.6617(3) 0.0210(11) Uani 1 1 d U . .
O17 O -0.1627(5) 0.2906(4) 0.6369(3) 0.0193(10) Uani 1 1 d U . .
O18 O -0.2565(4) 0.1477(4) 0.6606(3) 0.0194(10) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.2046(5) 0.2913(5) 0.7804(4) 0.0278(13) Uani 1 1 d U . .
O20 O 0.0237(5) 0.3761(4) 0.7402(4) 0.0259(12) Uani 1 1 d U . .
O21 O -0.0033(6) 0.5261(4) 0.6718(4) 0.0300(14) Uani 1 1 d U . .
O22 O -0.1546(5) 0.4567(4) 0.7165(4) 0.0258(12) Uani 1 1 d U . .
O23 O -0.3281(6) 0.5445(5) 0.7109(4) 0.0375(17) Uani 1 1 d U . .
O24 O -0.4166(5) 0.3849(5) 0.7192(4) 0.0294(13) Uani 1 1 d U . .
O25 O -0.5264(5) 0.2543(5) 0.7489(4) 0.0309(14) Uani 1 1 d U . .
O26 O -0.3553(5) 0.1604(4) 0.7634(3) 0.0248(12) Uani 1 1 d U . .
O27 O -0.3611(5) -0.0223(4) 0.7618(4) 0.0255(12) Uani 1 1 d U . .
O28 O -0.1742(5) 0.0775(4) 0.7904(3) 0.0246(12) Uani 1 1 d U . .
O29 O 0.0161(5) 0.0065(4) 0.8286(4) 0.0272(13) Uani 1 1 d U . .
O30 O 0.0862(5) 0.1515(4) 0.7888(3) 0.0207(11) Uani 1 1 d U . .
O31 O -0.0793(5) 0.2221(4) 0.7563(3) 0.0199(10) Uani 1 1 d U . .
O32 O -0.2589(5) 0.3040(4) 0.7306(3) 0.0227(11) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.0835(5) 0.3106(4) 0.8668(3) 0.0235(12) Uani 1 1 d U . .
O34 O -0.2372(5) 0.4535(4) 0.8248(4) 0.0292(13) Uani 1 1 d U . .
O35 O -0.3324(5) 0.3203(4) 0.8438(3) 0.0262(12) Uani 1 1 d U . .

```
O36 O -0.0006(5) 0.1767(4) 0.8916(3) 0.0223(11) Uani 1 1 d U . .
O37 O 0.0065(5) 0.3262(5) 0.9672(4) 0.0280(14) Uani 1 1 d U . .
O38 O -0.1599(5) 0.3857(5) 0.9406(4) 0.0293(14) Uani 1 1 d U . .
O39 O 0.5247(9) 0.1484(12) 1.1152(11) 0.125(6) Uani 1 1 d U . .
O40 O -0.5701(7) 0.6807(7) 0.9787(5) 0.058(3) Uani 1 1 d U . .
Si1 Si -0.18846(17) 0.24240(15) 0.69865(12) 0.0169(4) Uani 1 1 d U .
.
P1 P 0.05956(17) 0.26614(15) 0.92513(12) 0.0210(4) Uani 1 1 d U . .
P2 P -0.25700(19) 0.40409(16) 0.88263(13) 0.0237(4) Uani 1 1 d U . .
W1 W -0.07192(3) 0.23108(2) 0.564866(19) 0.02035(7) Uani 1 1 d U . .
W2 W -0.28790(3) 0.33122(2) 0.53697(2) 0.02332(7) Uani 1 1 d U . .
W3 W -0.41778(3) 0.13073(2) 0.568126(18) 0.02134(7) Uani 1 1 d U . .
W4 W -0.20243(3) 0.03189(2) 0.598472(18) 0.01967(7) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.07698(3) 0.26662(2) 0.761291(19) 0.02032(7) Uani 1 1 d U . .
W6 W -0.06784(3) 0.42727(2) 0.66238(2) 0.02292(7) Uani 1 1 d U . .
W7 W -0.29387(3) 0.43998(2) 0.71323(2) 0.02517(8) Uani 1 1 d U . .
W8 W -0.41219(3) 0.26743(2) 0.737183(19) 0.02289(7) Uani 1 1 d U . .
W9 W -0.31295(3) 0.05389(2) 0.724789(18) 0.02063(7) Uani 1 1 d U . .
W10 W -0.03654(3) 0.09419(2) 0.790774(18) 0.01986(7) Uani 1 1 d U . .
N1S N 0.8159(12) 0.2326(11) 0.3191(8) 0.076(4) Uani 1 1 d U . .
C1S C 0.8286(10) 0.3039(10) 0.3536(8) 0.049(3) Uani 1 1 d U . .
C2S C 0.8413(9) 0.3895(8) 0.3960(8) 0.046(3) Uani 1 1 d U . .
H2S1 H 0.7751 0.4091 0.3919 0.069 Uiso 1 1 calc R . .
H2S2 H 0.8772 0.4295 0.3779 0.069 Uiso 1 1 calc R . .
H2S3 H 0.8803 0.3877 0.4470 0.069 Uiso 1 1 calc R . .
N2S N 0.9343(15) 0.6561(9) 0.8218(8) 0.081(5) Uani 1 1 d U . .
C3S C 0.9653(11) 0.5976(8) 0.8496(7) 0.045(3) Uani 1 1 d U . .
C4S C 1.0030(10) 0.5266(9) 0.8868(8) 0.053(3) Uani 1 1 d U . .
H4S1 H 1.0745 0.5406 0.9164 0.079 Uiso 1 1 calc R . .
H4S2 H 0.9950 0.4743 0.8510 0.079 Uiso 1 1 calc R . .
H4S3 H 0.9650 0.5167 0.9180 0.079 Uiso 1 1 calc R . .
O1S O 0.6737 0.4623 0.2554 0.051(4) Uiso 0.616(16) 1 d PDU . .
C6S C 0.7321 0.5163 0.2384 0.13(3) Uiso 0.616(16) 1 d PU . .
H6S1 H 0.7854 0.5473 0.2828 0.157 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
H6S2 H 0.6917 0.5593 0.2124 0.157 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
C6SA C 0.7321 0.5163 0.2384 0.059(18) Uiso 0.384(16) 1 d PDU . .
C5S C 0.7779 0.4636 0.1909 0.052 Uiso 0.616(16) 1 d PU . .
H5S1 H 0.8217 0.5016 0.1773 0.078 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
H5S2 H 0.7244 0.4334 0.1472 0.078 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
H5S3 H 0.8177 0.4214 0.2173 0.078 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
C5SA C 0.7779 0.4636 0.1909 0.066(11) Uiso 0.384(16) 1 d PDU . .
H5S4 H 0.8489 0.4588 0.2187 0.098 Uiso 0.384(16) 1 calc PR . .
H5S5 H 0.7731 0.4917 0.1493 0.098 Uiso 0.384(16) 1 calc PR . .
H5S6 H 0.7418 0.4059 0.1737 0.098 Uiso 0.384(16) 1 calc PR . .
C8S C 0.5520 0.4429 0.3176 0.056 Uiso 0.616(16) 1 d PDU . .
H8S1 H 0.5198 0.4711 0.3501 0.084 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
H8S2 H 0.5894 0.3963 0.3389 0.084 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
H8S3 H 0.5003 0.4188 0.2706 0.084 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
C7S C 0.6261 0.5105 0.3066 0.227 Uiso 0.616(16) 1 d PDU . .
H7S1 H 0.5894 0.5579 0.2851 0.273 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
H7S2 H 0.6789 0.5353 0.3537 0.273 Uiso 0.616(16) 1 calc PR . .
N3S N 0.6827 0.5572 0.2938 0.050 Uiso 0.384(16) 1 d PDU . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
C1 0.025(4) 0.026(4) 0.037(4) 0.012(3) 0.008(3) 0.001(3)
C2 0.033(5) 0.026(5) 0.060(6) 0.016(4) 0.015(4) 0.007(4)
C3 0.031(5) 0.039(6) 0.031(4) 0.014(4) 0.001(4) -0.002(4)
C4 0.028(5) 0.040(6) 0.098(8) 0.038(6) 0.026(5) 0.009(4)
C5 0.030(5) 0.065(8) 0.043(6) 0.026(5) -0.006(4) -0.017(4)
```

C6	0.021(5)	0.058(8)	0.089(7)	0.051(6)	0.001(5)	0.002(4)
C7	0.023(6)	0.103(12)	0.157(12)	0.106(9)	-0.017(7)	-0.004(6)
C8	0.055(11)	0.150(19)	0.159(15)	0.104(11)	-0.062(11)	-0.023(11)
C9	0.025(4)	0.020(4)	0.033(4)	0.003(3)	0.015(3)	0.003(3)
C10	0.023(4)	0.029(5)	0.028(4)	-0.003(3)	0.004(3)	0.010(3)
C11	0.020(4)	0.046(6)	0.028(4)	-0.005(4)	0.010(3)	0.010(4)
C12	0.026(4)	0.039(5)	0.030(4)	0.001(4)	0.016(3)	0.006(4)
C13	0.028(4)	0.028(4)	0.022(4)	0.000(3)	0.008(3)	0.007(3)
C14	0.023(4)	0.022(4)	0.032(4)	0.004(3)	0.013(3)	0.003(3)
C15	0.022(4)	0.031(5)	0.039(5)	0.002(4)	0.019(3)	0.008(3)
C16	0.034(5)	0.031(5)	0.040(5)	0.003(4)	0.020(4)	0.017(4)
C17	0.026(4)	0.036(5)	0.039(5)	0.000(4)	0.016(4)	0.003(4)
C18	0.036(6)	0.039(5)	0.063(7)	0.011(5)	0.033(5)	0.011(5)
C19	0.025(4)	0.028(4)	0.039(5)	-0.001(3)	0.019(4)	0.002(3)
C20	0.036(5)	0.033(5)	0.037(5)	0.004(4)	0.009(4)	0.008(4)
C21	0.056(7)	0.039(6)	0.032(4)	0.010(4)	0.023(4)	-0.001(5)
C22	0.088(10)	0.047(8)	0.031(5)	0.003(5)	0.006(6)	0.012(7)
C23	0.025(4)	0.028(4)	0.036(5)	-0.007(4)	0.011(3)	0.005(3)
C24	0.026(4)	0.036(6)	0.080(9)	-0.014(6)	0.021(5)	0.011(4)
C25	0.052(7)	0.026(5)	0.105(11)	0.026(6)	0.048(7)	0.016(5)
C26	0.083(12)	0.047(8)	0.124(15)	0.011(9)	0.077(12)	0.016(8)
C27	0.041(6)	0.031(5)	0.061(6)	0.012(5)	0.030(5)	-0.001(4)
C28	0.059(9)	0.041(7)	0.093(11)	0.002(7)	0.051(8)	-0.004(6)
C29	0.051(7)	0.076(10)	0.083(8)	0.052(8)	0.031(6)	0.011(6)
C30	0.089(14)	0.103(14)	0.052(9)	0.010(9)	0.002(8)	-0.004(10)
C31	0.042(6)	0.029(5)	0.087(8)	0.027(5)	0.041(5)	0.017(4)
C32	0.051(9)	0.075(12)	0.120(14)	0.040(11)	0.016(8)	-0.011(8)
C33	0.064(9)	0.068(8)	0.045(6)	0.006(6)	0.030(6)	0.006(7)
C34	0.057(9)	0.075(9)	0.063(9)	-0.019(8)	0.018(7)	0.002(8)
C35	0.072(7)	0.068(10)	0.063(8)	0.020(8)	-0.004(8)	0.037(7)
C36	0.039(7)	0.072(13)	0.23(3)	-0.041(15)	-0.039(11)	0.022(7)
C37	0.033(5)	0.040(5)	0.047(6)	0.017(4)	0.006(5)	0.006(4)
C38	0.087(11)	0.030(6)	0.057(7)	0.012(5)	0.025(8)	0.015(6)
C39	0.069(7)	0.043(6)	0.052(7)	0.016(6)	0.032(6)	-0.003(6)
C40	0.046(6)	0.036(7)	0.118(14)	0.013(8)	0.031(7)	-0.009(6)
N1	0.021(3)	0.033(4)	0.020(3)	0.002(3)	0.012(3)	0.002(3)
N2	0.043(5)	0.029(4)	0.074(6)	0.029(4)	0.037(4)	0.016(3)
N3	0.038(4)	0.039(4)	0.030(4)	0.011(3)	0.008(3)	0.005(4)
O1	0.027(3)	0.022(3)	0.027(3)	0.006(2)	0.015(2)	0.008(2)
O2	0.030(3)	0.027(3)	0.018(2)	0.007(2)	0.011(2)	0.009(2)
O3	0.034(4)	0.036(4)	0.033(3)	0.016(3)	0.016(3)	0.017(3)
O4	0.022(3)	0.026(3)	0.025(3)	0.003(2)	0.009(2)	0.005(2)
O5	0.020(3)	0.035(4)	0.027(3)	0.000(3)	0.008(2)	0.006(2)
O6	0.023(3)	0.022(3)	0.018(2)	-0.001(2)	0.008(2)	0.001(2)
O7	0.030(3)	0.017(3)	0.029(3)	-0.001(2)	0.011(3)	0.001(2)
O8	0.025(3)	0.019(3)	0.025(3)	0.002(2)	0.014(2)	0.004(2)
O9	0.030(3)	0.022(3)	0.025(3)	0.007(2)	0.017(2)	0.008(2)
O10	0.037(3)	0.019(3)	0.028(3)	0.010(2)	0.020(2)	0.012(2)
O11	0.028(3)	0.022(3)	0.030(3)	0.008(2)	0.014(2)	0.011(2)
O12	0.022(3)	0.026(3)	0.022(3)	0.006(2)	0.007(2)	0.008(2)
O13	0.024(3)	0.023(3)	0.026(3)	-0.001(2)	0.009(2)	-0.002(2)
O14	0.023(3)	0.019(3)	0.022(3)	-0.001(2)	0.010(2)	-0.001(2)
O15	0.024(3)	0.018(3)	0.024(2)	0.003(2)	0.011(2)	0.005(2)
O16	0.022(3)	0.020(3)	0.023(2)	0.003(2)	0.011(2)	0.003(2)
O17	0.025(3)	0.021(3)	0.016(2)	0.0037(19)	0.0106(19)	0.004(2)
O18	0.019(2)	0.015(2)	0.023(3)	0.0003(19)	0.0081(19)	0.0032(19)
O19	0.026(3)	0.028(3)	0.032(3)	0.001(3)	0.015(3)	0.000(2)
O20	0.034(3)	0.020(3)	0.031(3)	0.004(2)	0.020(3)	0.004(2)
O21	0.036(4)	0.023(3)	0.038(4)	0.006(3)	0.021(3)	0.002(3)
O22	0.032(3)	0.021(3)	0.032(3)	0.008(2)	0.019(3)	0.002(2)
O23	0.051(5)	0.027(3)	0.046(4)	0.006(3)	0.032(4)	0.016(3)
O24	0.030(3)	0.027(3)	0.036(3)	0.004(3)	0.017(3)	0.008(2)
O25	0.024(3)	0.040(4)	0.031(3)	0.001(3)	0.015(3)	0.005(3)
O26	0.026(3)	0.027(3)	0.022(3)	0.001(2)	0.012(2)	0.000(2)
O27	0.025(3)	0.024(3)	0.027(3)	0.002(2)	0.010(2)	-0.001(2)
O28	0.030(3)	0.024(3)	0.018(3)	0.002(2)	0.007(2)	0.000(2)

```
O29 0.030(3) 0.026(3) 0.026(3) 0.008(2) 0.009(3) 0.007(3)
O30 0.020(3) 0.017(2) 0.023(3) 0.001(2) 0.007(2) 0.004(2)
O31 0.020(2) 0.017(2) 0.021(3) 0.002(2) 0.005(2) 0.0014(19)
O32 0.023(3) 0.018(3) 0.028(3) -0.002(2) 0.014(2) 0.002(2)
O33 0.023(3) 0.021(3) 0.027(3) 0.000(2) 0.011(2) 0.000(2)
O34 0.034(4) 0.021(3) 0.038(3) 0.001(2) 0.021(3) 0.002(3)
O35 0.031(3) 0.026(3) 0.024(3) -0.001(2) 0.015(2) 0.003(2)
O36 0.021(3) 0.026(3) 0.021(3) 0.004(2) 0.010(2) 0.001(2)
O37 0.027(3) 0.033(3) 0.027(3) 0.002(3) 0.013(3) 0.011(3)
O38 0.024(3) 0.030(3) 0.030(3) 0.000(3) 0.008(2) 0.004(3)
O39 0.036(6) 0.147(12) 0.219(15) 0.143(11) 0.029(8) 0.036(7)
O40 0.045(5) 0.076(7) 0.045(5) -0.011(5) 0.012(4) 0.033(5)
Si1 0.0183(10) 0.0150(9) 0.0173(9) 0.0013(7) 0.0065(8) 0.0043(8)
P1 0.0197(10) 0.0218(10) 0.0206(9) 0.0025(8) 0.0066(8) 0.0024(8)
P2 0.0253(11) 0.0230(11) 0.0242(10) -0.0008(8) 0.0121(8) 0.0054(8)
W1 0.02454(16) 0.01825(15) 0.02226(15) 0.00374(12) 0.01295(12)
0.00491(12)
W2 0.02728(17) 0.02266(16) 0.02394(16) 0.00769(13) 0.01192(13)
0.00868(13)
W3 0.02052(15) 0.02299(16) 0.01977(15) 0.00138(12) 0.00707(12)
0.00279(12)
W4 0.02247(16) 0.01699(14) 0.02058(14) 0.00113(11) 0.00966(12)
0.00297(11)
W5 0.02092(15) 0.01832(15) 0.02335(15) 0.00203(12) 0.01050(12)
0.00209(12)
W6 0.02955(18) 0.01630(15) 0.02761(17) 0.00456(12) 0.01550(14)
0.00406(12)
W7 0.03192(19) 0.01969(16) 0.02936(17) 0.00396(13) 0.01722(14)
0.00874(13)
W8 0.02206(16) 0.02436(17) 0.02409(16) 0.00017(13) 0.01198(13)
0.00362(13)
W9 0.02192(16) 0.02011(15) 0.02096(15) 0.00235(12) 0.00966(12)
0.00001(12)
W10 0.02162(15) 0.01733(14) 0.02092(15) 0.00390(11) 0.00757(12)
0.00307(11)
N1S 0.080(10) 0.070(8) 0.067(9) 0.007(6) 0.014(8) 0.006(8)
C1S 0.032(6) 0.061(7) 0.051(7) 0.018(5) 0.006(5) 0.008(6)
C2S 0.035(6) 0.049(6) 0.068(8) 0.034(5) 0.026(6) 0.005(5)
N2S 0.135(15) 0.047(7) 0.059(8) 0.005(6) 0.036(9) 0.008(8)
C3S 0.053(7) 0.038(6) 0.039(6) -0.011(4) 0.020(5) -0.001(5)
C4S 0.035(6) 0.047(7) 0.059(8) -0.006(5) 0.001(6) 0.007(5)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C3 1.388(15) . ?
C1 C2 1.389(15) . ?
```

```
C1 P1 1.802(10) . ?
C2 C4 1.392(17) . ?
C3 C5 1.411(15) . ?
C4 C6 1.42(2) . ?
C5 C6 1.37(2) . ?
C6 C7 1.521(17) . ?
C7 O39 1.22(3) . ?
C7 C8 1.52(4) . ?
C9 C11 1.374(13) . ?
C9 C10 1.411(13) . ?
C9 P2 1.776(9) . ?
C10 C12 1.391(13) . ?
C11 C13 1.396(12) . ?
C12 C14 1.367(13) . ?
C13 C14 1.398(13) . ?
C14 C15 1.494(12) . ?
C15 O40 1.197(13) . ?
C15 C16 1.488(14) . ?
C17 C18 1.515(15) . ?
C17 N1 1.521(12) . ?
C19 C20 1.487(15) . ?
C19 N1 1.517(13) . ?
C21 C22 1.496(18) . ?
C21 N1 1.525(13) . ?
C23 N1 1.514(12) . ?
C23 C24 1.542(14) . ?
C25 N2 1.503(14) . ?
C25 C26 1.542(14) . ?
C27 C28 1.498(18) . ?
C27 N2 1.505(15) . ?
C29 N2 1.471(18) . ?
C29 C30 1.542(16) . ?
C31 C32 1.50(2) . ?
C31 N2 1.539(15) . ?
C33 N3 1.503(15) . ?
C33 C34 1.53(2) . ?
C35 N3 1.480(16) . ?
C35 C36 1.546(17) . ?
C37 C38 1.527(19) . ?
C37 N3 1.532(15) . ?
C39 N3 1.489(16) . ?
C39 C40 1.51(2) . ?
O1 W1 1.710(6) . ?
O2 W1 1.904(6) . ?
O2 W2 1.929(6) . ?
O3 W2 1.692(7) . ?
O4 W2 1.881(7) . ?
O4 W3 1.918(7) . ?
O5 W3 1.698(6) . ?
O6 W4 1.901(6) . ?
O6 W3 1.917(6) . ?
O7 W4 1.707(6) . ?
O8 W1 1.904(6) . ?
O8 W4 1.904(6) . ?
O9 W1 1.902(6) . ?
O9 W6 1.938(6) . ?
O10 W6 1.920(7) . ?
O10 W2 1.928(7) . ?
O11 W7 1.871(6) . ?
O11 W2 1.956(6) . ?
O12 W8 1.862(6) . ?
O12 W3 1.956(6) . ?
O13 W3 1.884(7) . ?
O13 W9 1.953(7) . ?
O14 W4 1.899(6) . ?
O14 W9 1.944(6) . ?
```

```
O15 W10 1.848(6) . ?
O15 W4 1.971(6) . ?
O16 W5 1.845(6) . ?
O16 W1 1.982(6) . ?
O17 Si1 1.639(6) . ?
O17 W2 2.307(6) . ?
O17 W1 2.312(6) . ?
O17 W6 2.340(6) . ?
O18 Si1 1.637(6) . ?
O18 W4 2.302(6) . ?
O18 W3 2.320(6) . ?
O18 W9 2.330(6) . ?
O19 W5 1.701(7) . ?
O20 W6 1.907(7) . ?
O20 W5 1.909(7) . ?
O21 W6 1.694(7) . ?
O22 W6 1.886(6) . ?
O22 W7 1.925(7) . ?
O23 W7 1.697(7) . ?
O24 W8 1.893(7) . ?
O24 W7 1.930(7) . ?
O25 W8 1.693(7) . ?
O26 W9 1.902(7) . ?
O26 W8 1.915(7) . ?
O27 W9 1.699(7) . ?
O28 W9 1.898(6) . ?
O28 W10 1.922(7) . ?
O29 W10 1.702(7) . ?
O30 W10 1.911(6) . ?
O30 W5 1.925(6) . ?
O31 Si1 1.621(6) . ?
O31 W10 2.210(6) . ?
O31 W5 2.224(6) . ?
O32 Si1 1.600(6) . ?
O32 W7 2.216(6) . ?
O32 W8 2.240(6) . ?
O33 P1 1.537(7) . ?
O33 W5 2.043(6) . ?
O34 P2 1.547(7) . ?
O34 W7 2.021(7) . ?
O35 P2 1.553(7) . ?
O35 W8 2.018(6) . ?
O36 P1 1.518(7) . ?
O36 W10 2.069(6) . ?
O37 P1 1.522(7) . ?
O38 P2 1.499(7) . ?
N1S C1S 1.17(2) . ?
C1S C2S 1.42(2) . ?
N2S C3S 1.142(19) . ?
C3S C4S 1.42(2) . ?
O1S C6S 1.2992 . ?
O1S C7S 1.5039 . ?
C6S C5S 1.4655 . ?
C8S C7S 1.5306 . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C3 C1 C2 121.2(10) . . ?
C3 C1 P1 121.6(8) . . ?
C2 C1 P1 117.2(8) . . ?
```

```
C1 C2 C4 120.4(12) . . ?
C1 C3 C5 118.1(12) . . ?
C2 C4 C6 118.8(12) . . ?
C6 C5 C3 121.5(13) . . ?
C5 C6 C4 120.0(11) . . ?
C5 C6 C7 123.1(17) . . ?
C4 C6 C7 117.0(17) . . ?
O39 C7 C8 123.7(16) . . ?
O39 C7 C6 118(2) . . ?
C8 C7 C6 118(2) . . ?
C11 C9 C10 118.8(8) . . ?
C11 C9 P2 122.9(7) . . ?
C10 C9 P2 118.2(7) . . ?
C12 C10 C9 119.0(9) . . ?
C9 C11 C13 121.1(9) . . ?
C14 C12 C10 122.6(9) . . ?
C11 C13 C14 120.4(8) . . ?
C12 C14 C13 118.0(8) . . ?
C12 C14 C15 119.7(9) . . ?
C13 C14 C15 122.2(8) . . ?
O40 C15 C16 121.3(9) . . ?
O40 C15 C14 119.5(9) . . ?
C16 C15 C14 119.2(8) . . ?
C18 C17 N1 115.2(9) . . ?
C20 C19 N1 116.6(8) . . ?
C22 C21 N1 113.9(10) . . ?
N1 C23 C24 114.3(8) . . ?
N2 C25 C26 113.9(11) . . ?
C28 C27 N2 115.3(10) . . ?
N2 C29 C30 113.4(12) . . ?
C32 C31 N2 118.1(11) . . ?
N3 C33 C34 113.8(13) . . ?
N3 C35 C36 116.8(14) . . ?
C38 C37 N3 114.7(10) . . ?
N3 C39 C40 114.6(11) . . ?
C23 N1 C19 111.6(8) . . ?
C23 N1 C17 107.0(7) . . ?
C19 N1 C17 109.5(7) . . ?
C23 N1 C21 108.3(8) . . ?
C19 N1 C21 108.6(7) . . ?
C17 N1 C21 111.9(8) . . ?
C29 N2 C25 113.2(12) . . ?
C29 N2 C27 110.5(10) . . ?
C25 N2 C27 105.8(9) . . ?
C29 N2 C31 108.5(9) . . ?
C25 N2 C31 109.3(9) . . ?
C27 N2 C31 109.4(10) . . ?
C35 N3 C39 107.5(11) . . ?
C35 N3 C33 111.6(12) . . ?
C39 N3 C33 110.5(10) . . ?
C35 N3 C37 110.4(10) . . ?
C39 N3 C37 111.9(10) . . ?
C33 N3 C37 105.0(10) . . ?
W1 O2 W2 121.1(3) . . ?
W2 O4 W3 163.4(4) . . ?
W4 O6 W3 120.5(3) . . ?
W1 O8 W4 163.6(3) . . ?
W1 O9 W6 119.2(3) . . ?
W6 O10 W2 119.0(3) . . ?
W7 O11 W2 143.0(4) . . ?
W8 O12 W3 142.9(3) . . ?
W3 O13 W9 119.7(3) . . ?
W4 O14 W9 119.3(3) . . ?
W10 O15 W4 143.4(3) . . ?
W5 O16 W1 142.3(3) . . ?
Si1 O17 W2 123.3(3) . . ?
```

```
Si1 O17 W1 124.5(3) . . ?
W2 O17 W1 92.52(19) . . ?
Si1 O17 W6 124.9(3) . . ?
W2 O17 W6 91.1(2) . . ?
W1 O17 W6 90.8(2) . . ?
Si1 O18 W4 124.1(3) . . ?
Si1 O18 W3 124.3(3) . . ?
W4 O18 W3 91.7(2) . . ?
Si1 O18 W9 124.4(3) . . ?
W4 O18 W9 91.4(2) . . ?
W3 O18 W9 91.0(2) . . ?
W6 O20 W5 141.5(4) . . ?
W6 O22 W7 143.1(4) . . ?
W8 O24 W7 116.9(3) . . ?
W9 O26 W8 142.9(3) . . ?
W9 O28 W10 141.5(3) . . ?
W10 O30 W5 117.0(3) . . ?
Si1 O31 W10 127.1(3) . . ?
Si1 O31 W5 127.1(3) . . ?
W10 O31 W5 95.0(2) . . ?
Si1 O32 W7 128.0(4) . . ?
Si1 O32 W8 128.4(3) . . ?
W7 O32 W8 94.0(2) . . ?
P1 O33 W5 133.6(4) . . ?
P2 O34 W7 135.3(4) . . ?
P2 O35 W8 134.1(4) . . ?
P1 O36 W10 134.3(4) . . ?
O32 Si1 O31 118.0(3) . . ?
O32 Si1 O18 106.6(3) . . ?
O31 Si1 O18 107.2(3) . . ?
O32 Si1 O17 107.2(3) . . ?
O31 Si1 O17 106.8(3) . . ?
O18 Si1 O17 111.1(3) . . ?
O36 P1 O37 112.3(4) . . ?
O36 P1 O33 111.7(3) . . ?
O37 P1 O33 111.4(4) . . ?
O36 P1 C1 107.4(4) . . ?
O37 P1 C1 106.7(4) . . ?
O33 P1 C1 107.0(4) . . ?
O38 P2 O34 113.1(4) . . ?
O38 P2 O35 113.0(4) . . ?
O34 P2 O35 110.6(4) . . ?
O38 P2 C9 108.6(4) . . ?
O34 P2 C9 104.4(4) . . ?
O35 P2 C9 106.4(4) . . ?
O1 W1 O9 100.0(3) . . ?
O1 W1 O2 101.8(3) . . ?
O9 W1 O2 90.0(3) . . ?
O1 W1 O8 101.3(3) . . ?
O9 W1 O8 157.3(2) . . ?
O2 W1 O8 93.1(3) . . ?
O1 W1 O16 101.4(3) . . ?
O9 W1 O16 81.9(3) . . ?
O2 W1 O16 156.4(2) . . ?
O8 W1 O16 86.4(3) . . ?
O1 W1 O17 172.9(3) . . ?
O9 W1 O17 75.5(2) . . ?
O2 W1 O17 73.0(2) . . ?
O8 W1 O17 83.9(2) . . ?
O16 W1 O17 83.5(2) . . ?
O3 W2 O4 101.0(3) . . ?
O3 W2 O10 100.1(3) . . ?
O4 W2 O10 158.5(3) . . ?
O3 W2 O2 100.9(3) . . ?
O4 W2 O2 91.7(3) . . ?
O10 W2 O2 88.2(3) . . ?
```

```
O3 W2 O11 101.9(3) . . ?
O4 W2 O11 89.3(3) . . ?
O10 W2 O11 82.4(3) . . ?
O2 W2 O11 156.5(3) . . ?
O3 W2 O17 171.9(3) . . ?
O4 W2 O17 84.3(2) . . ?
O10 W2 O17 75.1(2) . . ?
O2 W2 O17 72.6(2) . . ?
O11 W2 O17 84.1(2) . . ?
O5 W3 O13 101.5(3) . . ?
O5 W3 O6 101.5(3) . . ?
O13 W3 O6 90.7(3) . . ?
O5 W3 O4 100.6(3) . . ?
O13 W3 O4 157.1(3) . . ?
O6 W3 O4 90.8(3) . . ?
O5 W3 O12 101.7(3) . . ?
O13 W3 O12 83.3(3) . . ?
O6 W3 O12 156.8(3) . . ?
O4 W3 O12 86.4(3) . . ?
O5 W3 O18 173.3(3) . . ?
O13 W3 O18 75.2(2) . . ?
O6 W3 O18 72.9(2) . . ?
O4 W3 O18 83.4(2) . . ?
O12 W3 O18 83.9(2) . . ?
O7 W4 O14 100.5(3) . . ?
O7 W4 O6 101.6(3) . . ?
O14 W4 O6 91.1(3) . . ?
O7 W4 O8 100.5(3) . . ?
O14 W4 O8 157.8(2) . . ?
O6 W4 O8 91.8(3) . . ?
O7 W4 O15 101.3(3) . . ?
O14 W4 O15 81.9(3) . . ?
O6 W4 O15 156.9(2) . . ?
O8 W4 O15 86.9(3) . . ?
O7 W4 O18 173.3(3) . . ?
O14 W4 O18 75.3(2) . . ?
O6 W4 O18 73.6(2) . . ?
O8 W4 O18 84.5(2) . . ?
O15 W4 O18 83.3(2) . . ?
O19 W5 O16 101.2(3) . . ?
O19 W5 O20 101.3(3) . . ?
O16 W5 O20 91.0(3) . . ?
O19 W5 O30 97.4(3) . . ?
O16 W5 O30 92.5(3) . . ?
O20 W5 O30 159.8(3) . . ?
O19 W5 O33 94.7(3) . . ?
O16 W5 O33 164.1(3) . . ?
O20 W5 O33 85.5(3) . . ?
O30 W5 O33 85.6(3) . . ?
O19 W5 O31 168.6(3) . . ?
O16 W5 O31 86.5(2) . . ?
O20 W5 O31 86.7(3) . . ?
O30 W5 O31 73.7(2) . . ?
O33 W5 O31 77.7(2) . . ?
O21 W6 O22 101.8(3) . . ?
O21 W6 O20 102.4(3) . . ?
O22 W6 O20 92.4(3) . . ?
O21 W6 O10 100.7(3) . . ?
O22 W6 O10 88.6(3) . . ?
O20 W6 O10 156.2(3) . . ?
O21 W6 O9 102.6(3) . . ?
O22 W6 O9 155.1(3) . . ?
O20 W6 O9 87.0(3) . . ?
O10 W6 O9 82.3(3) . . ?
O21 W6 O17 174.4(3) . . ?
O22 W6 O17 81.0(2) . . ?
```

```
O20 W6 O17 82.2(2) . . ?
O10 W6 O17 74.5(2) . . ?
O9 W6 O17 74.3(2) . . ?
O23 W7 O11 101.3(3) . . ?
O23 W7 O22 100.3(3) . . ?
O11 W7 O22 89.3(3) . . ?
O23 W7 O24 99.2(3) . . ?
O11 W7 O24 91.3(3) . . ?
O22 W7 O24 160.0(3) . . ?
O23 W7 O34 95.5(3) . . ?
O11 W7 O34 163.2(3) . . ?
O22 W7 O34 88.0(3) . . ?
O24 W7 O34 85.7(3) . . ?
O23 W7 O32 171.0(3) . . ?
O11 W7 O32 85.5(2) . . ?
O22 W7 O32 85.6(3) . . ?
O24 W7 O32 74.5(3) . . ?
O34 W7 O32 77.8(2) . . ?
O25 W8 O12 100.0(3) . . ?
O25 W8 O24 99.2(3) . . ?
O12 W8 O24 93.5(3) . . ?
O25 W8 O26 100.7(3) . . ?
O12 W8 O26 90.1(3) . . ?
O24 W8 O26 158.9(3) . . ?
O25 W8 O35 95.2(3) . . ?
O12 W8 O35 164.7(3) . . ?
O24 W8 O35 86.0(3) . . ?
O26 W8 O35 85.2(3) . . ?
O25 W8 O32 171.9(3) . . ?
O12 W8 O32 85.7(3) . . ?
O24 W8 O32 74.6(3) . . ?
O26 W8 O32 84.9(3) . . ?
O35 W8 O32 79.4(2) . . ?
O27 W9 O28 102.7(3) . . ?
O27 W9 O26 102.4(3) . . ?
O28 W9 O26 94.2(3) . . ?
O27 W9 O14 101.3(3) . . ?
O28 W9 O14 87.7(3) . . ?
O26 W9 O14 155.1(3) . . ?
O27 W9 O13 101.0(3) . . ?
O28 W9 O13 155.4(3) . . ?
O26 W9 O13 86.9(3) . . ?
O14 W9 O13 81.3(3) . . ?
O27 W9 O18 173.2(3) . . ?
O28 W9 O18 82.0(2) . . ?
O26 W9 O18 81.8(2) . . ?
O14 W9 O18 73.8(2) . . ?
O13 W9 O18 73.8(2) . . ?
O29 W10 O15 101.4(3) . . ?
O29 W10 O30 97.9(3) . . ?
O15 W10 O30 92.7(3) . . ?
O29 W10 O28 100.9(3) . . ?
O15 W10 O28 90.4(3) . . ?
O30 W10 O28 159.9(3) . . ?
O29 W10 O36 94.5(3) . . ?
O15 W10 O36 164.2(3) . . ?
O30 W10 O36 84.1(2) . . ?
O28 W10 O36 87.6(2) . . ?
O29 W10 O31 169.6(3) . . ?
O15 W10 O31 86.1(2) . . ?
O30 W10 O31 74.3(2) . . ?
O28 W10 O31 86.1(3) . . ?
O36 W10 O31 78.1(2) . . ?
N1S C1S C2S 178.2(17) . . ?
N2S C3S C4S 177.6(15) . . ?
C6S O1S C7S 110.985(5) . . ?
```

```
O1S C6S C5S 107.262(5) . . ?
O1S C7S C8S 106.783(5) . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.874
_diffrn_reflns_theta_full              30.89
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.874
_refine_diff_density_max    3.947
_refine_diff_density_min   -2.399
_refine_diff_density_rms    0.352
```